

**Název práce:** Molekulové krystaly pro NLO aplikace – sloučeniny 1*H*-pyrazol-karboxamidinu

**Autor:** Bc. Soňa Kohúteková

**Katedra:** Katedra anorganické chemie

**Vedoucí diplomové práce:** prof. RNDr. Ivan Němec, Ph.D.

**Abstrakt:** Předkládaná diplomová práce je zaměřena na přípravu a studium nových sloučenin báze 1*H*-pyrazol-karboxamidinu s ohledem na jejich využití v nelineární optice. Primárním cílem bylo připravit a charakterizovat krystalické soli nebo adukty s vybranými anorganickými a organickými kyselinami. Připravené sloučeniny byly studovány především pomocí metod vibrační spektroskopie a rentgenové difrakce. Pro interpretaci vibračních spekter a predikci nelineárních optických vlastností molekul byly využity kvantově-chemické výpočty. Pro optimalizaci výpočetního času s ohledem na soulad mezi vypočtenými a naměřenými spektry byly použity čtyři různé přístupy k výpočtům. U necentrosymetrických materiálů byla na práškových vzorcích měřena účinnost generování druhé harmonické frekvence.

**Klíčová slova:** NLO, vibrační spektroskopie, krystalová struktura, kvantově-chemické výpočty